

ADAM BUKOWY

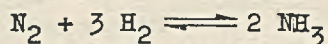
Katedra Teorii Regulacji

PROBLEMY OPTIMALIZACJI PROCESU SYNTEZY AMONIAKU  
PRZY POMOCY MASZYN CYFROWYCH

Streszczenie. W pracy niniejszej przeprowadzono próbę stworzenia modelu matematycznego dla konwertora amoniakalnego typu NEC i przedstawienia go w postaci dogodnej do dalszej analizy oraz przeprowadzono dyskusję możliwości optymalizacji jego pracy.

1. Opis procesu syntezy amoniaku

Synteza amoniaku przebiegająca zgodnie z wzorem

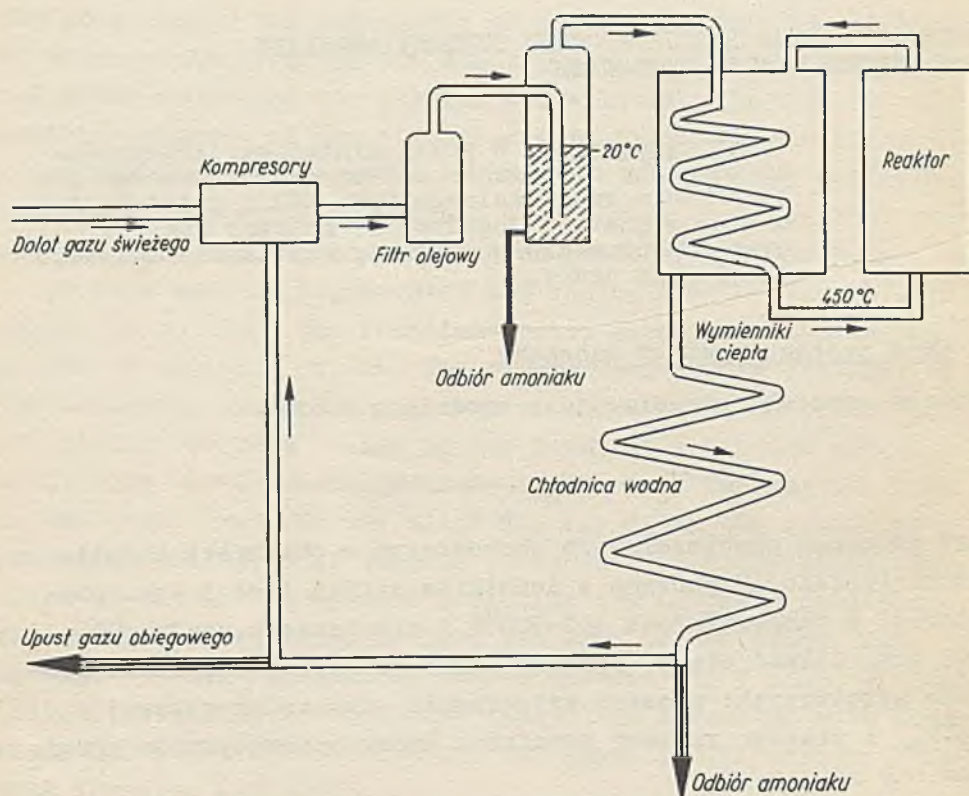


jest procesem egzotermicznym zachodzącym w obecności katalizatora (żelazo aktywowane z dodatkiem małych ilości tzw. promotorów) w temperaturach 450–500°C i ciśnieniach rzędu 300–1000 atm. Całość ciągu syntezy amoniaku składa się z dwu procesów wytwórczych: procesu wytwarzania mieszaniny gazowej (H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>) i procesu syntezy amoniaku, który schematycznie przedstawiono na rys. 1.

Świeży gaz do syntezy wraz z gazem znajdującym się w obiegu jest przetłaczany przez kompresory pod ciśnieniem 320 atm poprzez filtr olejowy (dla usunięcia z gazu resztek oleju i wyższych węglowodanów) i filtr amoniakalny (przemywanie gazu ciełym amoniakiem w temperaturze około -20°C).

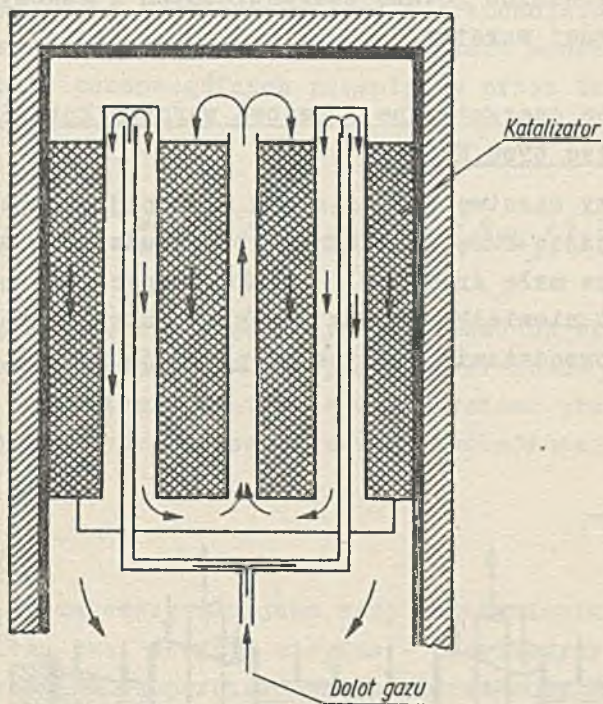
Oczyszczony gaz z filtrów podgrzewany jest we wstępnym i końcowym wymienniku ciepła do temperatury 450°C i wychodzi na katalizator, gdzie zachodzi reakcja syntezy. Ciepło reakcji odbierane jest z katalizatora przez świeże porcje gazu przechodzące w rurach przez warstwy katalizatora (patrz rys. 2).

Gorące produkty syntezy ogrzewają z kolei końcowy i wstępny wymiennik ciepła, a po ochłodzeniu ich do temperatury kilkunastu stopni Celsjusza i odebraniu wykroplonego amoniaku powracają do obiegu.

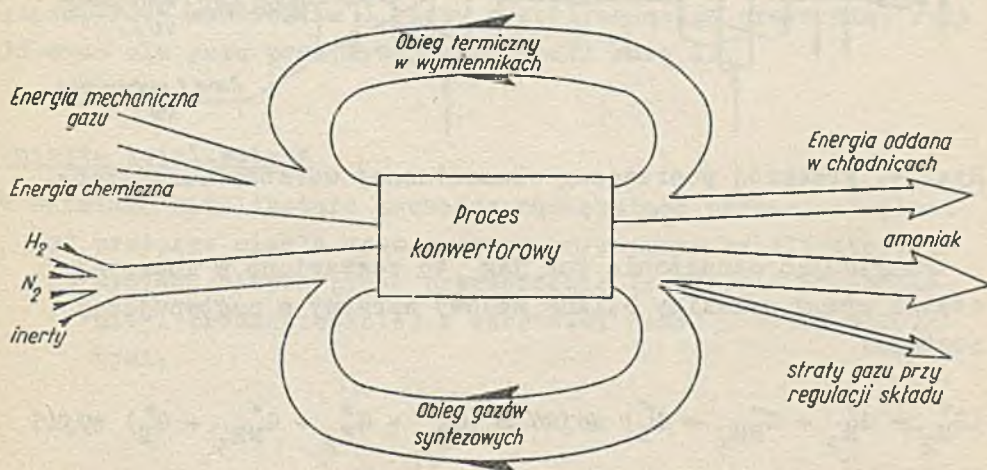


Rys. 1. Schemat instalacji syntezy amoniaku

W obiegu oprócz pewnych ilości niewykroplonego amoniaku znajdują się stale dość znaczne (rzędu 5-10%) ilości gazów znajdujących się w powietrzu lub surowcach służących do wytworzenia mieszaniny gazowej  $N_2 - 3 H_2$ , a nie reagujących w procesie syntezy. Gazy te nazwane inertami to głównie: argon, metan, hel. Regulację ich ilości w obiegu przeprowadza się przez okresowe wypuszczanie z obiegu pewnych ilości gazu. Obieg masy i energii w procesie ilustruje rys. 3.



Rys. 2. Przekrój podłużny konwertora typu NEC

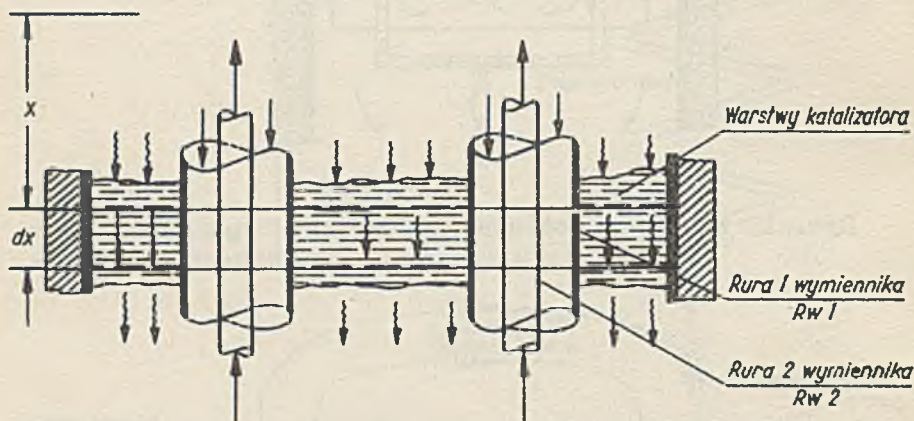


Rys. 3. Schemat obiegu mas i energii w procesie syntezy amoniaku

Ze względu na to, że w rozpatrywanym procesie centralnym elementem jest konwertor, poświęćmy następnym paragrafom ułożeniu odpowiednich równań energetycznych i masowych dla jego elementarnej warstwy.

## 2. Bilanse energetyczne i masowe warstwy katalizatora w konwertorze typu NEC

Rozpatrzmy warstwę katalizatora o pewnej grubości elementarnej  $dx$ . Pomijając rurę centralną, której udział w odbiorze ciepła z uwagi na małą średnicę i wysoką temperaturę płynącego w niej gazu jest niewielki możemy przekrój przez konwertor schematycznie przedstawić tak jak to pokazuje rys. 4.



Rys. 4. Przekrój poprzeczny elementarnej warstwy konwertora

Przyjmując oznaczenia tak jak to zestawiono w końcowej części pracy wyrazimy bilans masowy warstwy w następującej postaci:

$$(G_{N_2}^* + G_{H_2}^* + G_{NH_3}^* + G_I^*) \text{ wejść} = (G_{N_2}^* + G_{H_2}^* + G_{NH_3}^* + G_I^*) \text{ wyjść}$$

Równanie to jest słuszne, gdyż przy stosunkowo małych zmianach ciśnień gromadzenie się mas w warstwie katalizatora jest znikomo małe. Wyrażając przepływy masowe w gramomolach/godz. i dzieląc powyższą równość przez sumę przepływów masowych dojdziemy do wyrażenia poszczególnych przepływów przez tzw. ułamki molowe

$$G(\gamma_{H_2} + \gamma_{H_2} + \gamma_{NH_3} + \gamma_I) \text{ wejść} = G(\gamma_{N_2} + \gamma_{H_2} + \gamma_{NH_3} + \gamma_I) \text{ wyjść.}$$

Bilans masowy sprowadza się więc w tym przypadku do stwierdzenia, że suma ułamków molowych w przepływie jest równa jedności.

Stwierdzenie to zostanie następnie wykorzystane przy obliczeniu ilości ciepła wydzielonego w czasie zachodzącej reakcji.

#### Bilans termiczny

Ponieważ główną formą energii z jaką mamy do czynienia w trakcie trwania procesu jest energia cieplna - przeliczymy ocałość procesu energetycznego w oparciu o bilans termiczny. Bilans ten ułożymy osobno dla poszczególnych elementów warstwy konwertora a więc dla: katalizatora przesyconego przepływającym gazem, rury wymiennika I, gazu przepływającego przez nią, rury II oraz dla gazu przepływającego przez rurę II.

#### Warstwa katalizatora

W warstwie katalizatora zachodzą następujące procesy cieplne:

- a) przepływ ciepła wraz z gazem omijającym katalizator,
- b) wymiana ciepła przez przewodzenie (względnie przewodzenie i promieniowanie) z warstwami niżej i wyżej położonymi,

- c) wymiana ciepła przez konwekcję (gaz) i przewodzenie (katalizator i gaz) z rurą wymiennika I,
- d) magazynowanie ciepła w warstwie przez gaz i katalizator,
- e) wytwarzanie się ciepła w wyniku zachodzącej reakcji.

Zakładając identyczność temperatury gazu i katalizatora (w rzeczywistości różnice te nie przekraczają według [2] 2°C) oraz równość temperatur w różnych punktach warstwy, (i tu różnice w rzeczywistości nie przekraczają kilku stopni) ułożymy zależności spełniane przez poszczególne rozplywy ciepła.

Ilość ciepła wnoszonego do warstwy katalizatora przez przepływ gazu wynosi:

$$\frac{\partial^2 Q_{gk}}{\partial t \partial x} = G^*(C_p(x) \frac{\partial T_k}{\partial x} + T_{gk}(x) \frac{\partial C_p}{\partial x}) \cong G^*(C_p(x) \frac{\partial T_k}{\partial x}). \quad (1)$$

Ciepło odprowadzane z warstwy drogą przewodnictwa do warstw sąsiednich

$$\frac{\partial^2 Q_{vk}}{\partial t \partial x} = s\mu \frac{\partial^2 T_k}{\partial x^2}. \quad (2)$$

Ciepło dostarczone do rury I wymiennika:

$$\frac{\partial^2 Q_{kr1}}{\partial t \partial x} = 1_{r1} \mu_{r1-k} (T_k - T_{r1}). \quad (3)$$

Magazynowanie ciepła w warstwie gazu i katalizatora

$$\frac{\partial^2 Q_{Mgk}}{\partial t \partial x} = S_k C_k \frac{\partial T_k}{\partial t} + C_p S_k \rho_g \frac{\partial T_{gk}}{\partial t} \cong (S_k C_k + C_p S_k \rho_g) \frac{\partial T_k}{\partial t} \quad (4)$$

Ciepło wywiązujące się podczas reakcji:

$$\frac{\partial^2 Q_r}{\partial t \partial x} = G^* H \frac{\partial i_{NH_3}}{\partial x} \cong G^* H \frac{\partial f}{\partial x} \quad (5)$$

Stąd równanie termiczne warstwy katalizatora: (1 ... 5)

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial^2 Q_{gk}}{\partial t \partial x} - \frac{\partial^2 Q_{rk}}{\partial t \partial x} - \frac{\partial^2 Q_{kR1}}{\partial t \partial x} - \frac{\partial^2 Q_{gk}}{\partial t \partial x} + \frac{\partial^2 Q_r}{\partial t \partial x} = 0 \\ & -S \frac{\partial T_k}{\partial x} - G^* C_p \frac{\partial T_k}{\partial x} - 1R_1 \mu_{R1-k} (T_k - T_{R1}) - (S_k C_k + C_p S_k \rho_g) \frac{\partial T_k}{\partial t} + \\ & + G^* H \frac{\partial f}{\partial x} = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

W równaniu tym nie uwzględniono ucieczki ciepła do otoczenia ze względu na zazwyczaj dobrą izolację termiczną ścianek konwertora.

### Rura wewnętrzna I

W rurze wewnętrznej I zachodzą następujące procesy ciepłne:

- 1) Wymiana ciepła drogą przewodzenia z warstwami niżej i wyżej położonymi.
- 2) Wymiana ciepła z gazem omywającym ścianki rury oraz z katalizatorem znajdującym się na zewnątrz niej.
- 3) Magazynowanie ciepła przez ścianki rury (zazwyczaj do pominięcia wobec jej małej masy).

Procesy te opisują równania:

Ciepło dostarczone przez gaz:

$$\frac{\partial^2 Q_{rk}}{\partial x \partial t} = l_{R1} \mu_{R1-g} (T_k - T_{R1}). \quad (7)$$

Ciepło odbieramy przez gaz omijający jej wnętrze:

$$\frac{\partial^2 Q_r}{\partial x \partial t} = l_{R1} \mu_{R1-g} (T_{R1} - T_{GR1}). \quad (8)$$

Ciepło dostarczane drogą przewodnictwa przez warstwy niżej i wyżej położone:

$$\frac{\partial^2 Q_{rd}}{\partial x \partial t} = S_r \mu_{R1} \frac{\partial^2 T_{R1}}{\partial x^2}. \quad (9)$$

Pomijając efekt gromadzenia ciepła otrzymamy:

$$\frac{\partial^2 Q_{rg}}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 Q_{rk}}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 Q_{rp}}{\partial x \partial t} = 0$$

$$l_{R1} \mu_{R1-g} (T_k - T_{R1}) - l_{R1} \mu_{R1-g} (T_{R1} - T_{R1}) - s\mu \frac{\partial^2 T_{R1}}{\partial x^2} = 0. \quad (10)$$

Postępując według uprzednio opisanego schematu dojść możemy do ułożenia równań warstwy konwertora przez uwzględnienie kolejno: wymiany ciepła i jego gromadzenia przez gaz w rurze wewnętrznej 1, przepływu ciepła przez rurę wewnętrzną 2 oraz równań termicznych gazu w rurze 2.



Równania warstwy konwertora przyjmują wtedy postać:

$$-S_k \mu_k \frac{\partial^2 T_k}{\partial x^2} - G^* C_{pk} \frac{\partial T_k}{\partial x} - l_{R1} \mu_{R1k}(T_k) + l_{R1k} T_{R1} \mu_{R1,k} -$$

$$- (S_k C_k \varrho_k + C_p S_{gk} \varrho_{gk} \frac{\partial T_k}{\partial t} + G^* H \frac{\partial f}{\partial x}) = 0$$

$$l_{R1} \mu_{R1k} (T_k - T_{R1}) - l' \mu' (T_{R1} - T_{g1}) - S \mu_{R1} \frac{\partial^2 T_R}{\partial x^2} = 0$$

$$l_{R1} \mu_{R1-g} (T_{R1} - T_{g1}) - l_{R2} \mu_{R1-g1} (T_{g1} - T_{R1}) - G^* C_p \frac{\partial T_{g1}}{\partial x} - C_{pg1} S_{R1} \varrho_{g1} \frac{\partial T_{g1}}{\partial t} = 0$$

$$l_{R2} \mu_{g1-R2} (T_{g1} - T_{R2}) - S_{R2} \mu_{R2} \frac{\partial T_R}{\partial x^2} - l'_{R2} \mu_{g2R2} (T_{g2} - T_{R2}) = 0$$

$$l_{R2} \mu_{g2-R2} (T_{g2} - T_{R2}) - C_{pg2} S_{R2} \varrho_g \frac{\partial T_{g2}}{\partial t} + G^* C_p \frac{\partial T_{g2}}{\partial x} = 0.$$

#### Obliczenie współczynników równań bilansu termicznego

Odnosnie współczynników występujących w ułożonych równaniach cieplnych można powiedzieć, że tworzą one 4 zasadnicze grupy:

Grupa I - to współczynniki noszące charakter wymiarów geometrycznych. Są to obwody rur, powierzchnie przekroju itp.

Grupa II - to przewodności cieplne ciał stałych i gazów.

Grupa III - to ciepła właściwe ciał stałych i gazów.

Grupa IV - to ciepło reakcji.

Oprócz wyżej wymienionych grup współczynników koniecznym jest podanie równania kinetyki reakcji przy pomocy którego można by wyznaczyć ilość ciepła wywiązującego się na skutek przebiegu reakcji na danej warstwie katalizatora.

Grupą I. współczynników nie będziemy się tutaj zajmowali z uwagi na ich elementarny charakter.

Grupa II. (przewodności cieplne) jest grupą współczynników, z których takie jak: przewodnictwo cieplne rur stalowych czy przewodnictwo cieplne katalizatora są wielkościami stałymi i jako takie mogą być znalezione w tablicach wielkości fizycznych lub wyznaczone doświadczalnie. Omówimy więc tutaj tylko wyznaczanie współczynników złożonej wymiany cieplnej pomiędzy materiałami stałymi a gazem, które są funkcjami temperatury ciśnienia i własności geometrycznych powierzchni.

Dla stechiometrycznej mieszanki  $N_2$  i  $H_2$  współczynnik przewodności cieplnej pomiędzy gazem a rurą wymiennika (wliczając w to przewodność cieplną katalizatora) może być według 4 wyliczony ze wzoru:

$$\mu_{k-R1} = 7,7 G^* C_p e^{-\frac{4,6 D_p}{D_t'}} \left(\frac{D_p}{D_t'}\right) \left(\frac{D_p G^*}{q}\right)^{-0,3}, \quad (12)$$

gdzie:

$D_p$  - zastępcza średnica cząstek katalizatora,

$D_t'$  - zastępcza średnica rur chłodzących wyliczona jako

$D_t = \sqrt{\frac{4}{\pi}}$  (sumaryczna powierzchnia chłodząca).

Przewodność cieplną pomiędzy gazem płynącym w wymienniku a jego ściankami obliczyć można jako:

$$\mu_{R1-G1} = 0.0327 G^* C_p \left(\frac{D_1}{D_0}\right) \left(\frac{D_1 G}{q}\right)^{-0,2}, \quad (13)$$

gdzie:

$D_1$  i  $D_0$  - zewnętrzna i wewnętrzna średnica rur chłodzących. W naszym przypadku z uwagi na istnienie wewnętrznej rury chłodzącej, wzór ten powinien być skorygowany przez wprowadzenie w członie przedstawiającym liczbę Reynoldsa zastępczej średnicy rury.

Grupa III. (ciepła właściwe) jak i poprzednia może być traktowana częściowo jako grupa stałych fizycznych odczytywanych z tablic (materiały rur, katalizator) a częściowo jako grupa wielkości fizycznych zależnych w głównej mierze od temperatury.

Zależność tę przedstawia się najczęściej przy pomocy wzoru interpolacyjnego:

$$C_o = C_{po} + \beta_1 T + \beta_2 T^2 + \dots, \quad (14)$$

gdzie:

$C_{po}$  - ciepło właściwe mieszaniny obliczone czy wyznaczone dla określonej temperatury (najczęściej 450°C).

Ciepło właściwe mieszaniny gazowej można również obliczyć dla danego składu mieszanki jako:

$$C_{pm} = \sum_i m_i - C_{pi} \xi_i \frac{\sum_i G_i}{\sum_i M_i}, \quad (15)$$

gdzie:

$m_i$  - ułamki molowe gazów składowych,

$C_{pi}$  - ciepła właściwe gazów składowych,

$\xi_i$  - gramomol gazu składowego,

$\sum G_i$  - suma ilości gramomoli wszystkich gazów składowych,

$\sum M_i$  - suma mas gazów składowych.

Stąd współczynniki wielomianu interpolacyjnego dla mieszaniny:

$$\beta_1 = \sum_{k=1}^n \beta_{ik} m_k \xi_i \frac{\sum_i G_i}{\sum_i M_i}. \quad (16)$$

Grupa IV (ciepło reakcji). Ciepło wydzielające się w czasie reakcji chemicznej posiada charakter wielkości niezależnej od warunków zachodzenia procesu. Oprócz jednak wydzielania się ciepła na skutek zmiany wiązań molekularnych zachodzi równocześnie proces rozpuszczenia się produktów reakcji w gazach reagujących oraz zmiana ciepła właściwego nowego związku chemicznego w stosunku do ciepła właściwego składników reakcji. Zarówno przy rozpuszczaniu się gazów jak i na skutek zmian ciepła właściwego zostają pochłonięte pewne ilości ciepła. Ilości te są zależne z kolei od warunków przebiegu procesu. Tak więc ilość ciepła, który wydzielili się na zewnątrz w wyniku przereagowania jednego gramomola amoniaku może być obliczona jako:

$$H = H_0 + \sum \alpha_i T_i \quad (17)$$

(przy pominięciu ciepła rozpuszczania się gazów).

#### Równanie kinetyki reakcji

Reakcja syntezy amoniaku zachodzi według równania [4]:

$$\varepsilon_{\text{NH}_3} \frac{\sum G_i}{M_i} \frac{\partial m_{\text{NH}_3}}{\partial x} = \frac{\partial f_{\text{NH}_3}}{\partial x} = \frac{0,75}{\alpha^{3\beta} p^\beta G^*} \frac{1,5-3\beta}{2\varrho_{\text{ok}}} (1+z) \frac{I^2(1-b_1z)^3(1-b_2z)-z^2}{z^{2\alpha}(1-b_1z)^{3\beta}} \quad (18)$$

będącego pewną modyfikacją równania określającego szybkość dyfuzji. W równaniu tym, nazwanym równaniem Tiomkina-Pyżewa poszczególne współczynniki to:

$\varepsilon_0$  - gęstość zdysocjowanego gazu wlotowego w  $0^\circ\text{C}$  i 1 atm,

$G^*$  - przepływ masowy odniesiony do całkowitej powierzchni przekroju katalizatora,

$z$  - ułamek molowy amoniaku,

$z_r$  - ułamek molowy amoniaku w stanie równowagi w danej temperaturze,

$\alpha$  - ułamek molowy wodoru zdysocjowanego,

$P$  - ciśnienie całkowite,

$\alpha, \beta$  - stała szybkość reakcji syntezy i rozpadku amoniaku  
( $\alpha + \beta = 1$ ),

$k$  - stała Tiomkina-Pyżewa.

Wielkość  $L^2$  oblicza się ze wzoru:

$$L^2 = \frac{z_r}{(1-b_1 z_r)^3 (1-b_2 z_r)}, \quad (19)$$

gdzie:

$$b_1 = \frac{i_0 + 0,5 + 0,5\chi}{1-i_0}$$

$i_0$  ułamek molowy inertów  
w gazie zdysocjowanym

$$b_2 = \frac{i_0 + 0,5 + 1,5\chi}{1-i_0}$$

$3\chi$  stosunek ilości wodoru  
do azotu.

Wielkości  $a$  i  $\chi$  wiąże relacja:

$$a = \frac{3\chi}{3\chi + 1}.$$

Stosunkowo najwięcej kłopotu sprawia wyznaczenie  $z_r$ .

W postaci analitycznej,  $z_r$  jest rozwiązaniem równania:

$$\frac{z_r \frac{1+i_0}{1-i_0}}{1 - z_r \frac{1+i_0}{1-i_0}} = (1-i_0)^2 \frac{\sqrt{27}}{16} P K_p, \quad (20)$$

gdzie:

$K_p$  z kolei może być wyznaczone z reakcji:

$$\log_{10} K_p = \log_{10} K_p^* + P(A, B, C), \quad (21)$$

gdzie:

$$K_p^* = -2,6911 \log T - 5,5192 \cdot 10^{-5} T + 1,8488 \cdot 10^{-7} T^2 + \frac{2001,6}{T} + 2,6899$$

$$A = 1,419487 z_r^2 + 2,83899 z_r + 1,269225$$

$$B = \frac{3,8,76816}{T^2} \quad (22)$$

$$C = \frac{0,1191849}{T} + \frac{25122730}{T^4}$$

Stała Tiomkina-Pyzewa jest również zależna od temperatury:

$$K = K_{450^\circ} \frac{723,16}{T} e^{\frac{A}{R} \left( \frac{1}{723,16} - \frac{1}{T} \right)} \quad (23)$$

Stała  $K_{450^\circ}$  jest tutaj wielkością wyznaczaną eksperymentalnie dla danego typu katalizatora. Przy jej pomocy można również korygować w równaniu kinetyki reakcji efekty związane ze spadkiem aktywności katalizatora na przykład na skutek jego zatrucia czy rekryształizacji.

Ujmując uprzednio podane zależności w jedną całość równanie kinetyki można zapisać jako:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{(0,75)^{1-5-3\beta} 2\theta_0 K_{450^\circ}}{(1-i_0)^3 (1+i_0)^{2\beta} P^\beta G^*} \frac{723,16}{T} e^{\frac{A}{R} \left( \frac{1}{723,16} - \frac{1}{T} \right)} \left[ \frac{z_r^2}{(1-z_r)^4} - \frac{z}{(1-z)^4} \right] \frac{(1-z)^{1+3\alpha}}{z^{2\alpha}} (1+z) \quad (24)$$

### 3. Parametry podlegające optymalizacji

Z punktu widzenia ekonomii, konwertor amoniakalny jest urządzeniem, od którego pracy zależy cały szereg strat. Straty te to:

1. Koszty stałe amortyzacji urządzeń i obsługi. Są one czynnikiem zmuszającym do uzyskania możliwie maksymalnej produkcji, tak aby ich udział w jednostce produkowanego amoniaku był możliwie najniższy.

2. Koszty utrzymania obiegu i ochładzania gazów wylotowych z konwertora. Koszty rosną wraz z przepływem objętościowym w obiegu i ograniczają podnoszenie produkcji drogą przyspieszenia obiegu.

3. Koszty utrzymania obiegu i schładzania gazów wylotowych z konwertora. Koszty te rosną wraz z przepływem objętościowym w obiegu i ograniczają podnoszenie produkcji drogą przyspieszenia obiegu.

4. Koszty regulacji składu obiegu, który przeprowadza się drogą wypuszczania części gazów obiegowych.

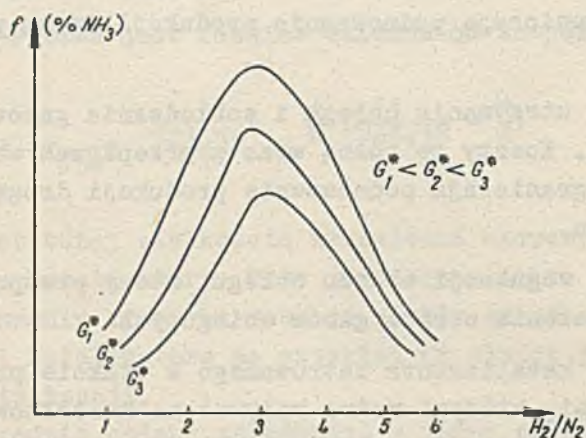
5. Koszty katalizatora zatrutowanego w trakcie pracy.

Parametrami, którymi można wpływać na kształtowanie się poszczególnych kosztów są natomiast:

- a) temperatura gazów dolotowych do konwertora,
- b) ciśnienie statyczne panujące w obiegu,
- c) skład mieszaniny gazowej,
- d) przepływ objętościowy gazu przez reaktor.

Biorąc pod uwagę ograniczenia związane z wytrzymałością instalacji oraz fakt stałego zwiększania się szybkości reakcji i podwyższania się stopnia przemiany wraz z ciśnieniem - trzeba zrezygnować ze stosowania ciśnienia jako czynnika regulacyjnego. Ze względów ekonomicznych powinno ono zostać utrzymanym na stałym poziomie, równym maksymalnej dopuszczalnej wartości.

Do podobnych wniosków doprowadza również analiza możliwości zastosowania zmian składu mieszaniny gazowej jako czynnika regulacyjnego - gdyż wyraźne optimum składu, to stałe utrzymanie stosunku ilości wodoru i azotu bliskiego mieszaninie stechiometrycznej i równego 2,7-2,9, przy możliwie jak najmniejszym udziale inertów.



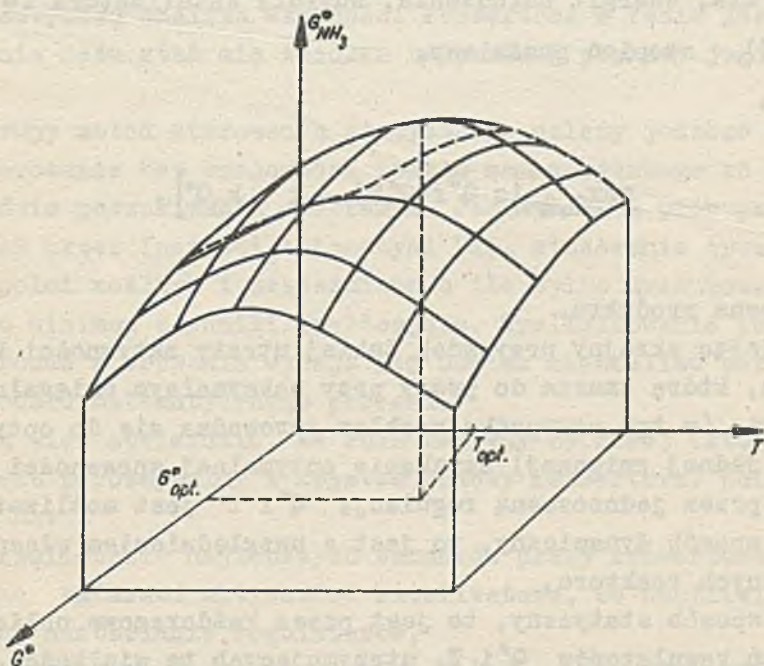
Rys. 5. Statyczna zależność stopnia konwersji ( $f$ ) od składu gazów obiegowych

Decyzja o zmianie składu gazu może zatem zostać podjęta jedynie wówczas, gdy straty ponoszone na skutek istniejącej różnicy pomiędzy składem optymalnym a istniejącym przekraczają wielkość strat jakie poniesiemy przy regulacji składu (koszt wypuszczonego gazu wraz z kosztem jego sprężenia do 300 atm). Decyzję taką można podjąć w oparciu o charakterystyki statyczne konwertora i analizę statystyczną zmian składu gazu w czasie.

Głównymi parametrami procesu pozwalającym na regulację jego przebiegu pozostają więc: temperatura gazów wchodzących do kon-



wertora oraz przepływ przez konwertor. Ich wpływ na stopień przemiany pokazuje rysunek 6.



Rys. 6. Zależności pomiędzy ilością wytwarzanego amoniaku a przepływem i temperaturą gazów obiegowych

#### 4. Możliwości optymalizacji procesu syntezy amoniaku

Biorąc pod uwagę rezultaty rozważań przeprowadzonych w poprzednim paragrafie, możemy dla utrzymania optymalnej produkcji w każdym momencie podejmować decyzję tylko odnośnie zmiany przepływu i temperatury gazów. Podstawą podjęcia tych decyzji może być bądź dążenie do uzyskania najtańszego produktu, bądź też uzyskanie maksymalnych zysków z instalacji.

W pierwszym przypadku będzie tu więc chodziło o uzyskanie

$$\min_{T, Q^*} \frac{k_1 + k_2(Q^*, T)}{Q^* f(Q^*, T)},$$

gdzie:

$k_1$  - koszty stałe energii, obsługi oraz amortyzacji urządzeń,

$k_2$  - koszty zależne od warunków pracy, tj. energii sprężania, energii chłodzenia, zużycia katalizatora itd.

$f(Q^*, T)$  - stopień przemiany,

w drugim

$$\max_{T, Q} [c Q^* f(Q^*, T) - k - k_2 Q^*],$$

gdzie:

$c$  - cena produktu.

Pomijając skrajny przypadek takiej utraty aktywności katalizatora, która zmusza do pracy przy maksymalnym osiągalnym przepływie (w tym przypadku problem sprowadza się do optymalizacji jednej zmiennej) uzyskanie optymalnej sprawności konwertora przez jednoczesną regulację  $Q^*$  i  $T$  jest możliwe:

a) w sposób dynamiczny, to jest z uwzględnieniem własności dynamicznych reaktora,

b) w sposób statyczny, to jest przez każdorazowe obliczanie nastawień regulatorów  $Q^*$  i  $T$ , utrzymujących te wielkości na stałym poziomie.

ad a) Obliczanie najlepszych przebiegów wielkości sterujących jest operacją żmudną nawet w przypadku liniowych własności procesu. Biorąc pod uwagę nawet bardzo niedokładne prze-liczenie równań (15) z warunkami brzegowymi i uwzględnieniem równań (22) możemy ocenić ilość operacji matematycznych koniecznych do wykonania jednego kroku iteracji na  $10^7$ - $10^8$  a zatem ilości operacji rzędu  $10^9$ - $10^{10}$  dla wyznaczenia jednego kroku sterowania.

Oznacza to, że korzystanie z przytoczonych równań jest praktycznie niemożliwe, gdyż cykl sterowania trwałby od kilku godzin do kilku dni w zależności od użytej maszyny liczącej.

ad b) Natomiast 15-30 minutowy cykl sterowania statycznego jest w zupełności dopuszczalny o ile pozostałe parametry procesu b będą stabilizowane. Należy zatem przyjąć, że w najlepszym razie opłacalnym może być sterowanie statyczne konwertora przy stabilizacji pozostałych parametrów procesu. Natomiast maszynowa analiza własności konwertora w fazie jego projektowania może stać się źródłem radykalnej poprawy jego własności.

Do grupy metod sterowania statycznego należy jeszcze zaliczyć sterowanie bez znajomości modelu matematycznego to jest na zasadzie poszukiwania ekstremum. Jak wynika z prób przeprowadzonych przez Instytut Automatyki PAN, stosowanie tych metod jest w pełni możliwe i uzasadnione o ile tylko zredukowane zostaną do minimum czynniki zakłócające. Wyeliminowanie ich wpływu na proces sterowania wydaje się bowiem niemożliwe bez znajomości modelu matematycznego procesu.

Można więc stwierdzić, że rola maszyny cyfrowej (której koszt jest porównywalny z kosztem budowy konwertora) polegać powinna na:

1) przeliczeniu najlepszych warunków pracy konwertora związanych ze zmianami aktywności katalizatora, co umożliwiłoby optymalne nastawianie regulatorów,

2) obliczaniu granicznych zmian składu gazu, przy których efekty podniesienia stopnia konwersji równoważą straty gazu na regulację składu mieszanki,

3) uwzględnianiu sezonowych zmian temperatur otoczenia w obliczeniach optymalnych warunków pracy konwertora i sprężarek,

a więc na spełnianiu roli "doradcy". Ponadto wydaje się możliwym przeprowadzanie maszynowej "diagnostyki" konwertorów (zwykle uszkodzenia wnętrza powodują swoiste zaburzenia w rozkładzie temperatur oraz gwałtowne zmiany stopnia konwersji) oraz określanie momentu ekonomicznej nieopłacalności dalszej eksploatacji konwertora (wyznaczenie terminu remontu).

Spis ważniejszych oznaczeń stosowanych w pracy:

- $\eta$  - ułamek molowy  
 $G$  - przepływ masowy  
 $Q^*$  - ilość ciepła  
 $T$  - temperatura  
 $t$  - czas  
 $x$  - odległość od wierzchołka konwertora  
 $c_p$  - ciepło właściwe gazu przy stałym ciśnieniu  
 $\mu$  - współczynnik przewodnictwa cieplnego  
 $l_{R1}, l_{R2}$  - długości zewnętrznych obwodów rur współśrodkowych  
 $l'_{R1}, l'_{R2}$  - długości wewnętrznych obwodów rur współśrodkowych  
 $S_k$  - pole powierzchni przekroju przestrzeni zajętej przez katalizator  
 $S_{R1}, S_{R2}$  - pole przekroju rur 1 i 2  
 $f$  - stopień przemiany (konwersji).

LITERATURA

- [1] KJAER Jorgen: Measurement of temperature and conversion in fixed-bed catalytic reactors. Jul.Gjellerups Forlag - Copenhagen 1958 r.  
 [2] NIELSEN Anders: An investigation on promoted iron catalysts for the synthesis of ammonia. Gjellerups Forlag Copenhagen 1956 r.  
 [3] Technologia związków azotowych - Praca zbiorowa. PWN W-wa 1965 r. wyd. II.  
 [4] Calculation of ammonia converters on an electronic digital computer. Jorgen Kjaer. Akademisk Forlag Copenhagen 1963r.

ПРОБЛЕМЫ ОПТИМАЛИЗАЦИИ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА АММИАКА  
ПРИ ПОМОЩИ ЦИФРОВЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МАШИН

## Р е з ю м е

В статье представлены основные свойства процесса синтеза аммиака типа НЕС. Дифференциальные уравнения элементарного слоя конвертора выражены простой математической форме удобной для общего анализа процесса оптимизации. Проведены расчеты оптимизации параметров а также исследовано возможность применения цифровой вычислительной машины для выполнения расчетов оптимального режима конвертора. Последняя часть работы посвящена исследованию возможности применения динамической оптимизации с точки зрения времени употребляемой для расчетов.

PROBLEMS OF AMMONIA SYNTHESIS  
OPTIMALISATION USING DIGITAL COMPUTERS

## S u m m a r y

In this paper the general properties of an NEC Ammonia converter are given. The differential equations of the elementary converter layer are introduced in the convenient mathematic form for the general analysis of optimization. Discussion showing the optimization parameters and the possibility of use an digital computer to optimization calculus is prepared. The last part of this paper is concerned with the possibility of using dynamics optimization from the point of view of time involved for calculation.